

Optimisation et recuit quantique

Samuel Deleplanque¹

Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Junia, Univ. Polytechnique Hauts-de-France, UMR 8520 - IEMN -
Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie, F-59000 Lille, France
samuel.deleplanque@junia.com

Mots-clés : *calcul quantique, recuit quantique, optimisation.*

1 Introduction

Le recuit quantique est une méthode basée sur le recuit simulé ([1]) où les variations de températures sont remplacées par des fluctuations quantiques et dont l'effet tunnel (*quantum tunnelling*) qui en découle provoque des transitions d'états des qubits une fois ceux-ci mesurés (i.e., pour le problème d'optimisation en cours de résolution, le passage d'une solution à une autre). En 1998, [2] montre que le recuit quantique (*quantum annealing*) converge plus rapidement vers l'optimal que le recuit simulé. Dès l'année suivante, la société canadienne *D-Wave* entreprend l'élaboration d'une machine exécutant ce mécanisme.

Il s'agit d'évaluer les avancées réalisées par les ordinateurs quantiques à base de recuit quantique par la résolution de problèmes d'optimisation. Ces ordinateurs qui sont toujours conçus pour la plupart par *D-Wave* ne basent pas leur fonctionnement sur le même paradigme que celui des ordinateurs quantiques à portes universelles d'IBM et de Google. Ici, l'interface entre l'unité de calcul et l'utilisateur est de bien plus haut niveau (i.e., loin du *QPU -Quantum Processor Unit-*) et si le nombre de problèmes pouvant être traités de cette façon est moindre, ces ordinateurs semblent bien s'accorder avec les problèmes d'optimisation, ou du moins un sous-ensemble de ces derniers. Le traitement appliqué aux qubits de ces processeurs est bien moins complexe que celui qui enchaîne les portes quantiques, ce qui les rend bien plus simples à fabriquer. Les qubits au service du recuit quantique sont ainsi en plus grand nombre que sur les machines quantiques universelles (la machine *Advantage* de *D-Wave* possède plus de 5000 qubits) et leur connectivité est également plus importante (les qubits d'*Advantage* ont une connectivité de 15, i.e., chaque qubit est connecté à 15 autres par des coupleurs). La Figure 1 représente le graphe des qubits d'une de ces machines. Il existe déjà des applications concrètes de ces ordinateurs qui ont été commercialisés dès 2011. En optimisation, on peut faire référence au *Paint Shop Problem* (e.g., avec Volkswagen ([3])). Dans d'autres domaines, comme celui de la simulation de matériaux, l'obtention de résultats a fortement été accélérée même en faisant la comparaison avec des méthodes considérées comme les plus performantes sur les ordinateurs classiques. Dans [4], les temps de calcul, pour cette expérience, ont été divisés par plus d'un million.

2 Mapping des QUBO sur le graphe des qubits

Les problèmes quadratiques sans contrainte et à variables binaires (*QUBO*) sont les premiers problèmes d'optimisation qui peuvent être directement traités par les *QPU* à base de recuit quantique. Ici, il faut voir l'analogie suivante : les qubits sont les variables binaires, et chaque paire de qubits interconnectés par un coupleur a une forte incidence sur l'égalité (ou pas) des binaires qui composent la paire associée. Le recuit quantique se base sur le fait que tout système tend à chercher son état d'énergie minimum. En partant de qubits en état de superposition (où toutes les solutions au problème sont équitablement représentées), le *QPU*

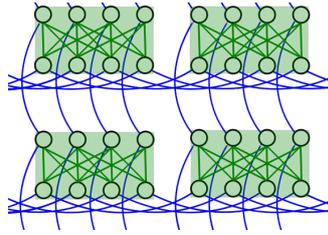


FIG. 1 – Exemple de graphe Chimera d’un QPU de *D-Wave* à faible connectivité. Les qubits sont disposés en 4 cellules unitaires (carrés verts) interconnectés par des coupleurs externes (lignes bleues).

va appliquer un champ magnétique par à-coups en ciblant les qubits et coupleurs de façon à rendre énergiquement favorable leur valeur allant dans le sens de l’optimisation. Ce processus permet également une pondération à la fois sur les valeurs les plus probables que prendront les binaires seuls mais aussi ceux connectés par un coupleur. Pour les qubits couplés, ce sont les produits (quadratiques) des variables binaires qui sont ici en jeu et le système physique rendra énergiquement favorable le fait qu’elles prennent (ou pas) les mêmes valeurs. Bien qu’il y ait toujours un débat aujourd’hui sur le fait que *D-Wave* utilise l’intrication pour ces paires de qubits, c’est bien le résultat de la mesure que donnerait cette dernière que nous pouvons considérer ici. Durant le processus, la pondération de chaque élément configure le système et la recherche du minimum énergétique de ce dernier augmentera la probabilité de mesurer des états des qubits traduisant une solution optimale ou une proche de celle(s)-ci.

3 Machines hybrides et dernières évolutions

Pour travailler sur ces machines à base de recuit quantique afin de résoudre des problèmes d’optimisation cette fois avec contraintes, ces dernières doivent être relaxées tout en pénalisant la fonction Objectif. La pondération de ces pénalités se fait difficilement à la main et nécessite généralement des résolutions intermédiaires pour affiner les coefficients comme c’est souvent le cas dans la recherche de bons multiplicateurs d’une relaxation lagrangienne. Il faut ainsi coupler un ordinateur à recuit quantique pour la résolution des problèmes sous forme de QUBO à un ordinateur classique traitant de la recherche de ces coefficients. C’est une des raisons de la mise en place de machines hybrides, mais bien d’autres situations les justifient. Nous verrons aussi différents problèmes qui peuvent être traités avec ces machines à travers des formulations quadratiques simples. En plus de la résolution du problème du *Max Cut*, nous verrons celle du *Capacitated Vehicle Routing Problem* décomposé en deux sous-problèmes quadratiques (*cluster* et *TSP*). Nous verrons également la récente (Octobre 2021) possibilité de traiter directement avec des MILP bien que la technique employée par les machines hybrides de *D-Wave* reste encore à déterminer.

Références

- [1] Scott Kirkpatrick, C Daniel Gelatt, and Mario P Vecchi. Optimization by Simulated Annealing *science*, 220(4598) :671–680, 1983.
- [2] Kadowaki, Tadashi and Nishimori, Hidetoshi. Quantum Annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*, 58-5, APS, p5355, 1998.
- [3] Yarkoni, S., Alekseyenko, A., Streif, M., Von Dollen, D., Neukart, F., Bäck, T.. Multi-car paint shop optimization with quantum annealing. *arXiv preprint* arXiv :2109.07876, 2021.
- [4] King, A.D., Raymond, J., Lanting, T. et al. Scaling advantage over path-integral Monte Carlo in quantum simulation of geometrically frustrated magnets. *Nature Communication*, 12, 1113, 2021.